

Определение профиля легирования примесей лантана в многослойных тонкопленочных структурах титаната бария

А.П. Буровихин, М.А. Мишнёв, П.Ю. Белявский, И.А. Старков, И.Л. Мыльников

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», 197376

Санкт-Петербург, Россия

e-mail: antonburovihin@mail.ru

В последнее время проводятся активные исследования сегнетоэлектрических тонких плёнок для электрокалорических применений. Наиболее простым вариантом оптимизации и усиления электрокалорического эффекта (ЭКЭ), с точки зрения технологического процесса, является использование легирующих добавок. При этом немаловажную роль при определении величин охлаждения играет профиль легирования полученной структуры. В данной работе для расчёта пространственного распределения концентрации примеси использовалось классическое уравнение диффузии Фика [1]:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2},$$

где коэффициент диффузии – $D = D_0 \exp(-E_a / kT)$, E_a – энергия активации, D_0 – предэкспоненциальный множитель. Расчёт энергии активации диффузии производится, исходя из первичных пространственно-энергетических характеристик свободных атомов [2]. Ввиду сложного протекания диффузии при полноценном технологическом процессе, численная реализация подхода производилась в программном пакете COMSOL Multiphysics [3].

В качестве примера применения предложенной модели рассматривается трёхслойная плёнка титаната бария BaTiO₃ (ВТО), выращенная на подложке Al₂O₃, с толщиной слоёв 1 мкм и концентрацией примеси 5%, 3% и 1%, соответственно. В качестве легирующей добавки использовался лантан La. Слои наносились поэтапно. На Рисунке 1а схематически показан поперечный срез трёхслойной плёнки ВТО. Время напыления каждого слоя 4 часа, температура подложки – 500°C. После напыления проводился послеростовой отжиг на атмосфере при следующем профиле температуры: подъём до 850°C за 3 часа, отжиг при этой температуре – 4 часа и охлаждение 200°C в час до комнатной температуры. Расчётное значение энергии активации для исследуемого технологического процесса оказалось равным $E_a = 2.6$ эВ. Полученные величины имеют хорошее совпадение с экспериментальными данными, опубликованными в литературе [4-5]. Итоговый профиль концентрации лантана в трёхслойной плёнке после проведения всех этапов роста и послеростового отжига показан на Рисунке 1б.

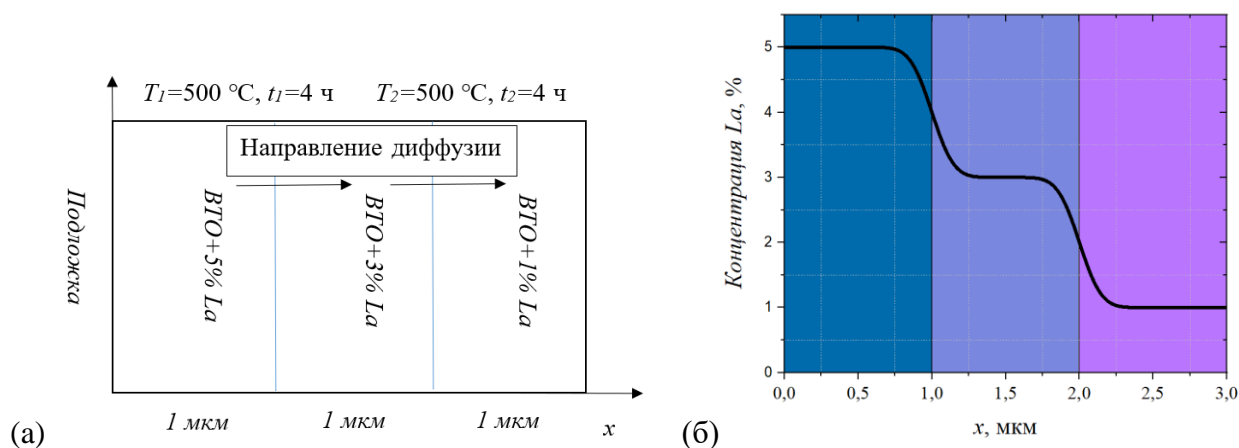


Рисунок 1. (а) Качественная картина трёхслойной плёнки титаната бария. (б) Профиль концентрации лантана в тонкой плёнке титаната бария.

Результаты вычислений показывают отсутствие влияния соседних слоёв на диффузию вблизи границы раздела двух заданных плёнок. В этой области распределение концентрации легирования описывается интегралом вероятности, как в случае границы двух полупространств. Учёт межслойной диффузии в тонких плёнках позволяет определить реальные значения электрокалорического эффекта в плёночных структурах. Согласно проведённым моделированиям, в зависимости от итогового профиля, величина ЭКЭ может отличаться в разы при одинаковом уровне начального легирования.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 19-79-10074).

1. А.А. Барыбин, В.И. Томилин, В.И. Шаповалов, *Физико-технологические основы макро-, микро- и наноэлектроники* (Litres), 442 (2015).
2. Г.А. Кораблев, С.Д. Соловьев, *Вестник Ижевского государственного технического университета* **4**, 128 (2007).
3. Comsol Multiphysics manual, version 5.3a (2019).
4. J. Nowotny, M. Rekas, *Ceramics International* **20**, 265 (1994).
5. R. Wernicke, *Philips Research Reports* **31**, 526 (1976).